

MUSTERLÖSUNG 3

Aufgabe 1: Laut de Broglie kann man der Materie immer eine Welle zuordnen. Es gilt aber, dass man unter Umständen diese Wellencharakter, die durch Quantenmechanik gegeben ist, vernachlässigen darf. Man darf also nur dann die Wellencharakter vernachlässigen und klassisch rechnen, wenn man keine Quantisierungseffekte berücksichtigen soll. Die Quantisierungseffekte kommen im Allgemeinen vor und werden zum Beispiel bei den einfachen Quantentopfstrukturen, die wir bei den letzten Übungsblättern studiert haben, an den diskreten, oder anders gesagt, quantisierten Energieeigenwerten (in 1D: $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m d^2} n^2$) widerspiegelt. Man kann anhand der Formel der diskreten Energienwerte merken, dass der Energieunterschied zwischen zwei quantisierten Energieniveaus mit steigender Länge des Potentialtopfes d abnimmt ($\Delta E = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m d^2} (n_2^2 - n_1^2) \Rightarrow \Delta E \propto d^{-2}$). Der Verlauf der Energienwerte wird deshalb kontinuierlicher, wenn d größer wird, damit werden Quantisierungseffekte vernachlässigbar klein, wenn d genug groß ist. Und trotzdem der Potentialtopf tatsächlich reale Strukturen modelliert und seine Länge d dem Bauelementdimensionen entspricht, darf man bei elektronischen Bauelementen den Wellencharakter der Elektronen nur dann vernachlässigen, wenn d genug groß ist. Wenn aber die Bauelementdimension d etwa in der gleichen Größenordnung wie die de Broglie-Wellenlänge der Elektronen ist, dann sollte die Wellencharakter berücksichtigt werden.

Um diese d zu berechnen, bei dem man quantenmechanisch rechnen muss, geht man wie folgt vor:

- Typische kinetische Energien sind laut Angabe: $E_{kin} = 1\text{eV}$
- Es gilt außerdem für E_{kin} die Formel: $E_{kin} = \frac{1}{2} m_0 v^2 \Leftrightarrow v^2 = \frac{2E_{kin}}{m_0} \Leftrightarrow v = \sqrt{\frac{2E_{kin}}{m_0}}$ (nur pos. v sinnvoll)
- Für den Impuls der Elektronen gilt: $p = m_0 v \Rightarrow p = m_0 \sqrt{\frac{2E_{kin}}{m_0}} \Leftrightarrow p = \sqrt{2m_0 E_{kin}}$
- Und für de Broglie-Wellenlänge gilt: $\lambda = \frac{h}{p} \Rightarrow \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 E_{kin}}} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \text{Js}}{\sqrt{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{kg} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{J}}} \approx 1,23 \cdot 10^{-9} \text{m} = 1,23 \text{nm}$

⇒ Man soll bei Bauelementdimensionen von ca. 1nm die Wellencharakter der Elektronen berücksichtigen.

Aufgabe 2: In den bisherigen Übungsblättern sind immer von rechteckförmigem Potentialtopf mit unendlich hohen Barrieren ausgegangen, was aber ein überidealisiertes ist und der Realität nicht entspricht (dient aber ab und zu als gutes Modell). Deshalb ist nun ein parabelförmiger Potentialtopf gegeben, mit $V(x) = sx^2$. Laut Angabe ist $V(x)$ zeitunabhängig und man darf deshalb mit der zeitunabhängigen eindimensionalen Schrödinger-Gleichung von folgender Form rechnen:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + (V(x) - E) \psi(x) = 0$$

Außerdem wird auch der Lösungsansatz dieser Gleichung für den Grundzustand ($n=1$) mit $\psi(x) = b \cdot e^{-\frac{1}{2}\sqrt{a}x^2}$ gegeben.

a) Aus den letzten beiden Blättern sind die Energieeigenwerte des rechteckförmigen Potentialtopfs mit unendlich hohen Barrieren bekannt:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m d^2} n^2$$

b) Laut der Fragestellung soll die gegebene Lösung in die Schrödinger-Gl. eingesetzt und damit $E = E_1$ berechnet und a angepasst werden. Dafür braucht man zuerst die zweite Ableitung der Lösung:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial x} (b e^{-\frac{1}{2}\sqrt{a}x^2}) = \frac{\partial}{\partial x} (b e^{-\frac{1}{2}\sqrt{a}x^2} \cdot (-\sqrt{a}x)) = \frac{\partial}{\partial x} (-\sqrt{a} b x e^{-\frac{1}{2}\sqrt{a}x^2}) \\ &= -\sqrt{a} b x e^{-\frac{1}{2}\sqrt{a}x^2} - \sqrt{a} b e^{-\frac{1}{2}\sqrt{a}x^2} = (ax^2 - \sqrt{a}) b e^{-\frac{1}{2}\sqrt{a}x^2} = (ax^2 - \sqrt{a}) \psi(x) \end{aligned}$$

Diese Gleichung soll für alle x erfüllt sein, deshalb ist es sinnvoll, diese als ein Polynom von x mit Koeffizienten umzuschreiben.

→ Setzt man dieses mit $V(x) = sx^2$ und $E = E_1$ ein: $\frac{-\hbar^2}{2m} (ax^2 - \sqrt{a}) \psi(x) + (sx^2 - E_1) \psi(x) = 0 \Rightarrow$ deshalb ist es sinnvoll, diese als ein Polynom von x mit Koeffizienten umzuschreiben.

$$\Rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} ax^2 \psi(x) + \sqrt{a} \frac{\hbar^2}{2m} \psi(x) + sx^2 \psi(x) - E_1 \psi(x) = 0 \Leftrightarrow (s\psi(x) - \frac{\hbar^2}{2m} a \psi(x)) x^2 + (\frac{\hbar^2}{2m} \sqrt{a} \psi(x) - E_1 \psi(x)) = 0$$

$$\Rightarrow \left(s - \frac{\hbar^2}{2m} a\right) x^2 \psi(x) + \left(\frac{\hbar^2}{2m} a - E_1\right) \psi(x) = 0$$

→ Damit diese Gleichung für alle x erfüllt sein soll, sollen die beiden Koeffizienten, d.h. die Koeffizienten des $x^2 \psi(x)$ -Terms und die des $\psi(x)$ -Terms, verschwinden. Man bekommt also zwei Gleichungen:

$$1) s - \frac{\hbar^2}{2m} a = 0$$

$$2) \frac{\hbar^2}{2m} a - E_1 = 0$$

→ Aus 2) kann man E_1 bestimmen: $E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} a$

→ Aus 1) kann man a anpassen: $s = \frac{\hbar^2}{2m} a \Leftrightarrow a = \frac{2ms}{\hbar^2}$

→ Setzt man a in die Formel für E_1 so bestimmt man E_1 endgültig: $E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{2ms}{\hbar^2} = \hbar \cdot \frac{s}{2m}$

⇒ Die angepasste Lösung $\psi_1(x)$ für das Elektron im parabolischen Potentialtopf lautet damit:

$$\psi_1(x) = b \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \frac{\sqrt{2ms}}{\hbar} \cdot x^2}$$

c) Die Normierungsbedingung lautet im Allgemeinen wie folgt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$$

Da $|\psi(x)|^2$ die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte des Elektrons ist, ergibt das Integral von $-\infty$ bis $+\infty$ darüber die Wahrscheinlichkeit, dass das Elektron sich irgendwo befindet, d.h. existiert. Die Normierungsbedingung bedeutet damit, dass das Elektron existieren muss, da die Wahrscheinlichkeit dafür 1 ist.

d) Nun soll mittels der Normierungsbedingung die letzte Unbekannte b in $\psi_1(x)$ berechnet werden. Es gilt:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_1(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\left| b \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \frac{\sqrt{2ms}}{\hbar} \cdot x^2} \right|^2}_{>0} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(b \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \frac{\sqrt{2ms}}{\hbar} \cdot x^2} \right)^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} b^2 \cdot e^{-\frac{\sqrt{2ms}}{\hbar} \cdot x^2} dx = b^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\sqrt{2ms}}{\hbar} \cdot x^2} dx \quad \ominus$$

→ An dieser Stelle ist es sinnvoll, das Integral in zwei Integrale einmal von $-\infty$ bis 0 und einmal 0 bis ∞ zu teilen, um die in der Angabe gegebene Hilfestellung zu benutzen, wobei hier α für die Variable a der Hilfestellung

$a = \frac{\sqrt{2ms}}{\hbar}$ gilt.

$$\ominus b^2 \left(\int_{-\infty}^0 e^{-\frac{\sqrt{2ms}}{\hbar} \cdot x^2} dx + \int_0^{\infty} e^{-\frac{\sqrt{2ms}}{\hbar} \cdot x^2} dx \right) = b^2 \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{2ms}}{\hbar}}} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{2ms}}{\hbar}}} \right) = b^2 \cdot \left(\sqrt{\frac{\pi}{\frac{\sqrt{2ms}}{\hbar}}} \right) = b^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi \cdot \hbar}{\sqrt{2ms}}} \stackrel{!}{=} 1$$

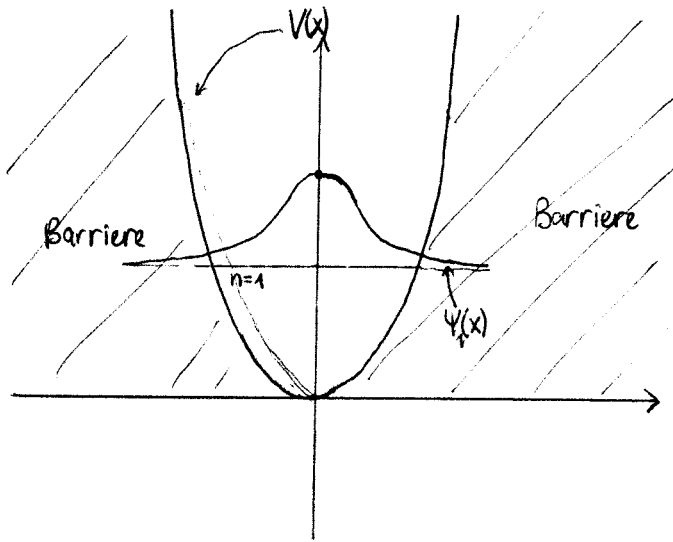
→ Dadurch kann man b berechnen:

$$b^2 \cdot \sqrt{\frac{\pi \cdot \hbar}{\sqrt{2ms}}} = 1 \Leftrightarrow b^2 \cdot \frac{(\pi \cdot \hbar)^{1/2}}{(2ms)^{1/4}} = 1 \Leftrightarrow b^2 = \frac{(2ms)^{1/4}}{\sqrt{\pi \cdot \hbar}} \Rightarrow b = \frac{(2ms)^{1/8}}{(\pi \cdot \hbar)^{1/4}} = \frac{(2ms)^{1/8}}{(\pi^2 \cdot \hbar^2)^{1/8}} = \left(\frac{2ms}{\pi^2 \cdot \hbar^2} \right)^{1/8} = 8 \sqrt{\frac{2ms}{\pi^2 \cdot \hbar^2}}$$

→ Und die Lösung kann wieder angepasst werden:

$$\psi_1(x) = 8 \sqrt{\frac{2ms}{\pi^2 \cdot \hbar^2}} \cdot e^{-\frac{1}{2} \cdot \frac{\sqrt{2ms}}{\hbar} \cdot x^2}$$

e) Jetzt soll die Wellenfunktion $\psi_1(x)$ qualitativ gezeichnet werden. Man kann relativ einfach überlegen, dass $\psi(x) \sim e^{-x^2}$ sowohl für $-\infty$ als auch für $+\infty$ asymptotisch gegen 0 konvergiert. Außerdem ist dieser Verlauf exponentiell und $\psi(x)$ hat ihr Maximum bei $x=0$. Die entsprechende Skizze sieht wie folgt aus:



- Diese Lösung widerspricht dem klassischen Teilchenbild, da die Wellenfunktion $\psi_1(x)$ des Elektrons innerhalb der Barrieren nicht verschwindet und damit es möglich ist, dass das Elektron sich in den Barrieren befindet. Das kann aber mit dem klassischen Teilchenbild nicht erklärt werden, da laut der klassischen Physik, das Elektron beim Auftreffen der Barriere reflektiert würde.
- Diese Lösung zeigt damit, dass ein Elektron mit endlicher Wahrscheinlichkeit sich innerhalb der Barrieren aufhalten kann, was die Basis für die Tunnelphänomene darstellt. Ein Tunnelphänomen ist das Ereignis, dass ein Teilchen eine Barriere durchtunnelt.